2020-1, "STATPHYS", AULA 13

OBJETIVO: EXPLICAR DETALHADAMENTE O ALGORITMO DE METROPOLIS.

ONDE ESTAMOS: 2.2 CMTD's

* ALGORITMO DE METROPOLIS

- NEWMAN & BARKEMA, "MONTE CARLO METHODS IN STATISTICAL PHYSICS"

→ PROBLEMA: PELA COMPLEXIDADE COMPUTACIONAL, É IMPOSSÍVEL CALCULAR A FUNÇÃO PARTIÇÃO Z DO MODELO DE ISING EM DIMENSÃO $D \geq 2$.

$$\sigma = \vec{S} = \{S_i\}, \quad i = 1, \dots, N = L \times L.$$

$$Z = \sum_{\sigma} e^{-\beta E_\sigma}, \quad E_\sigma = \mathcal{H}(\vec{S})$$

→ SOLUÇÃO: VAMOS CONSTRUIR UMA CMTD (= DEFINIR UMA MATRIZ ESTOCÁSTICA DE TRANSIÇÃO) QUE CONVERGE PARA A DISTRIBUIÇÃO DE EQUILÍBRIO TÉRMICO PARA QUALQUER CONDIÇÃO INICIAL.

$$p_\sigma = \frac{e^{-\beta E_\sigma}}{Z} \Rightarrow \frac{p_\sigma}{p_{\sigma'}} = e^{-\beta(E_\sigma - E_{\sigma'})}$$

USANDO BALANÇO DETALHADO, VAMOS CONSTRUIR T TAL QUE

$$\boxed{p_\sigma T_{\sigma' \leftarrow \sigma} = p_{\sigma'} T_{\sigma \leftarrow \sigma'}}.$$

(i) DINÂMICA DE SPIN ÚNICO ("SINGLE SPIN-FLIP DYNAMICS")

A CADA PASSO TEMPORAL, NO MÁXIMO UM SPIN ALTERA SEU ESTADO, $s_i \to -s_i$. O CANDIDATO À ALTERAÇÃO É SORTEADO UNIFORMEMENTE ENTRE OS N SPINS. A PROBABILIDADE DO "FLIP" OCORRER SERÁ DETERMINADA LOGO MAIS, MAS ADIANTA-SE QUE ELA DEPENDERÁ DA TEMPERATURA E DA VIZINHANÇA DO SPIN QUE PODE "VIRAR".

SEJA $d_{\sigma\sigma'} \equiv \sum_{i=1}^{N} \left(1 - \delta_{s_i, s'_i}\right) = N - \sum_{i=1}^{N} \delta_{s_i, s'_i}$

A DISTÂNCIA ENTRE $\sigma = \vec{s}$ E $\sigma' = \vec{s}' = \{s'_1, \dots, s'_N\}$.

SE $d_{\sigma\sigma'} > 1$, $\boxed{T_{\sigma' \leftarrow \sigma} = 0 = T_{\sigma \leftarrow \sigma'}}$. EM UM PASSO, HÁ $N+1$ ESTADOS POSSÍVEIS.

SPINS QUE PODEM MUDAR

SE NADA MUDAR

CLARAMENTE, MESMO SEM AINDA ESTAR COMPLETAMENTE DEFINIDA, T SERÁ IRREDUTÍVEL E APERIÓDICA, POIS QUALQUER σ' PODE SER ALCANÇADA A PARTIR DE σ ARBITRÁRIA, MESMO QUE O NÚMERO DE PASSOS DEVA EXCEDER $d_{\sigma\sigma'}$. NA VERDADE, T SERÁ REGULAR POIS $\boxed{(T^N)_{\sigma' \leftarrow \sigma} > 0}$.

SÓ FALTA OBTER BALANÇO DETALHADO QUANDO $d_{\sigma\sigma'} \leq 1$. NA VERDADE, SÓ FALTA O CASO $d_{\sigma\sigma'} = 1$, POIS $p_\sigma T_{\sigma\sigma} = p_\sigma T_{\sigma\sigma}$ ...

(ii) DECOMPOSIÇÃO DA TRANSIÇÃO EM PROPOSTA + ACEITAÇÃO

$M_{\sigma' \leftarrow \sigma}$: PROBABILIDADE DE QUE O ESTADO σ' SEJA PROPOSTO COMO O ESTADO DO SISTEMA EM $t+1$, DADO QUE O ESTADO É σ EM t.

$A_{\sigma' \leftarrow \sigma}$: PROB. DE QUE TAL PROPOSTA SEJA ACEITA.

$$\boxed{T_{\sigma' \leftarrow \sigma} = M_{\sigma' \leftarrow \sigma} \cdot A_{\sigma' \leftarrow \sigma}}$$

ORA, NO "SINGLE SPIN-FLIP", $M_{\sigma' \leftarrow \sigma} = 0$ PARA $d_{\sigma'\sigma} > 1$ E, PARA $d_{\sigma'\sigma} = 1$, $\boxed{M_{\sigma' \leftarrow \sigma} = 1/N}$. NA EQUAÇÃO DE BALANÇO DETALHADO,

$$p_\sigma T_{\sigma' \leftarrow \sigma} = p_{\sigma'} T_{\sigma \leftarrow \sigma'} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow p_\sigma A_{\sigma' \leftarrow \sigma} = p_{\sigma'} A_{\sigma \leftarrow \sigma'} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \boxed{A_{\sigma' \leftarrow \sigma} = e^{-\beta(E_{\sigma'} - E_\sigma)} \cdot A_{\sigma \leftarrow \sigma'}},$$

POIS QUEREMOS O PESO DE BOLTZMANN.

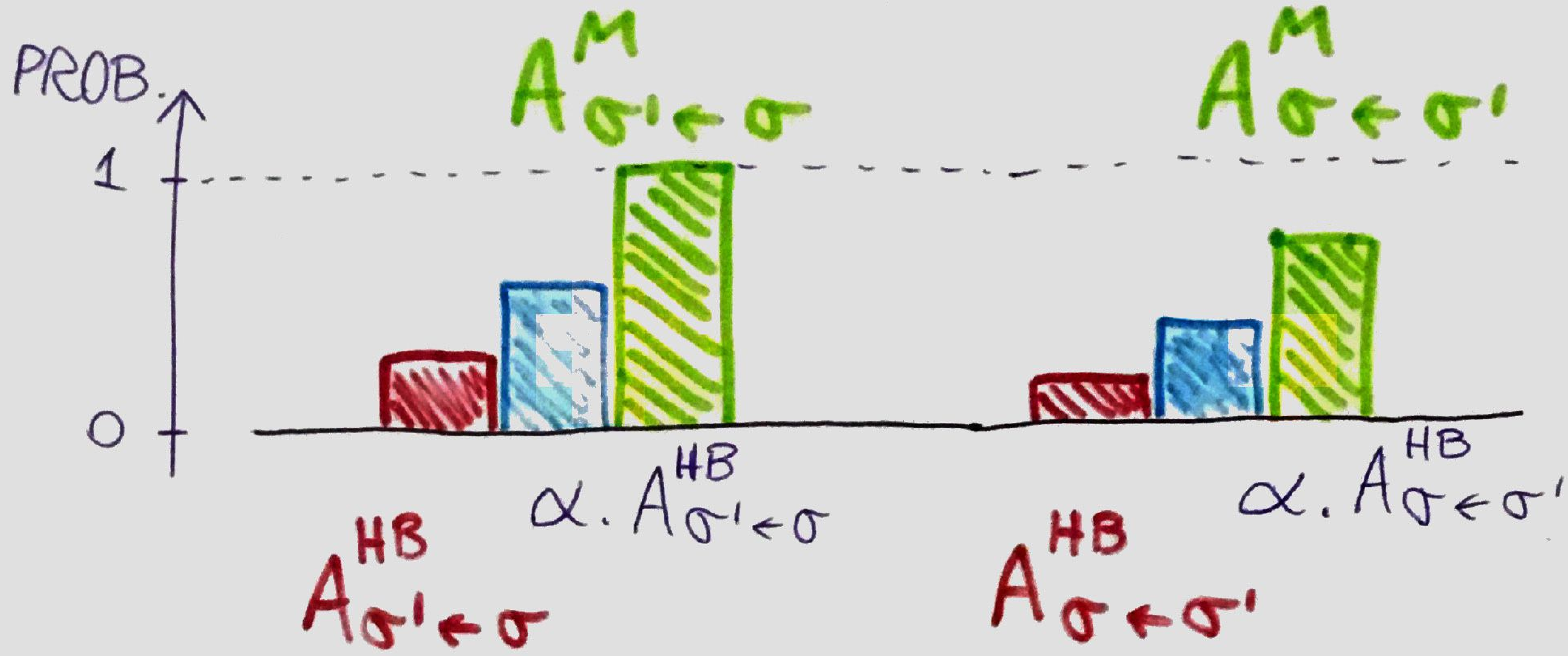
→ TEMOS DOIS GRAUS DE LIBERDADE E UM VÍNCULO: HÁ INFINITAS DINÂMICAS DISTINTAS QUE LEVAM AO ESTADO TÉRMICO!

→ SE O INTERESSE RESIDE NA DINÂMICA, ESCOLHA O QUE DESEJA. É POPULAR O "BANHO TÉRMICO" (HEAT BATH),

$$A^{HB}_{\sigma' \leftarrow \sigma} = \frac{e^{-\beta E_{\sigma'}}}{e^{-\beta E_{\sigma}} + e^{-\beta E_{\sigma'}}} ,$$

POR EXEMPLO. NA VERDADE, NOSSO INTERESSE AGORA É CHEGAR AO ESTADO ESTACIONÁRIO DA FORMA MAIS EFICIENTE POSSÍVEL, O QUE EXIGE CONSIDERAÇÕES COMPUTACIONAIS.

→ PARA FIXAR O RACIOCÍNIO, DIGAMOS QUE $E_{\sigma'} < E_{\sigma}$. NESSA CONDIÇÃO, $e^{-\beta(E_{\sigma'} - E_{\sigma})} > 1$ E $A^{HB}_{\sigma' \leftarrow \sigma} > A^{HB}_{\sigma \leftarrow \sigma'}$. NA VERDADE, $A_{\sigma' \leftarrow \sigma} > A_{\sigma \leftarrow \sigma'}$ EM GERAL.



→ A RAZÃO ENTRE AS PROBABILIDADES DE ACEITAÇÃO DE MUDANÇAS DE ESTADO NÃO PODE MUDAR SEM VIOLAR O BALANÇO DETALHADO, MAS HÁ UM FATOR DE ESCALA α QUE MAXIMIZA A ACEITAÇÃO! É A CONDIÇÃO DE METROPOLIS,

$$\boxed{A_{\sigma'\leftarrow\sigma} = \begin{cases} 1, & \text{SE } E_{\sigma'} < E_{\sigma} \\ e^{-\beta(E_{\sigma'} - E_{\sigma})}, & \text{SE } E_{\sigma'} > E_{\sigma} \end{cases}}$$

→ CONSIDERAÇÕES PRÁTICAS: NÃO PRECISAMOS CALCULAR $E_{\sigma} = \mathcal{H}(\vec{S})$ EM CADA PASSO, POIS AS MUDANÇAS SÃO LOCAIS NA REDE!

→ SEJA i O ÍNDICE DO SPIN "CANDIDATO A VIRAR". SÓ PRECISAMOS ANALISAR SUA VIZINHANÇA, V_i. NOTE QUE

$\boxed{S_j(t+1) = S_j(t)}$ SE $j \neq i$ E

$\boxed{S_i(t+1) = -S_i(t)}$.

$$E_{\sigma'} - E_\sigma =$$

$$= \left\{ -J \sum_{\langle jk \rangle} S_j(t+1) . S_k(t+1) - H \sum_j S_j(t+1) \right\} -$$

$$- \left\{ -J \sum_{\langle jk \rangle} S_j(t) . S_k(t) - H \sum_j S_j(t) \right.$$

$$\overset{\bullet}{=} \left\{ -J . S_i(t+1) \sum_{j \in V_i} S_j(t+1) - H\, S_i(t+1) \right\} -$$

$$- \left\{ -J . S_i(t) \sum_{j \in V_i} S_j(t) - H . S_i(t) \right\} \overset{\bullet\bullet}{=}$$

$$\overset{\bullet\bullet}{=} 2J . S_i(t) \sum_{j \in V_i} S_j(t) + 2H . S_i(t)$$